



Université  
de Lille



**FACULTÉ  
DES SCIENCES ET  
TECHNOLOGIES**  
Département Physique

# Physique de la déformation : les polycristaux

Sébastien Merkel

Professeur, département de Physique

Laboratoire UMET (Unité Matériaux et Transformations)

[sebastien.merkel@univ-lille.fr](mailto:sebastien.merkel@univ-lille.fr)

## 2- Orientation d'un grain

Comment représenter l'orientation d'un grain ?

- Définition de repères appropriés.
- Représentation par angles d'Euler :
  - Présentation ;
  - Convention de Bunge.
- Représentation matricielle :
  - Définition ;
  - Propriétés.
- Représentation graphique :
  - Introduction aux figures de pôle ;
  - Exemples et applications.

## 2- Orientation d'un grain

### a- Angles d'Euler

# Représentation des orientations

Besoin de définir plusieurs systèmes de coordonnées :

- Système de coordonnées de chaque cristal ;
- Système de coordonnées associé à l'échantillon.

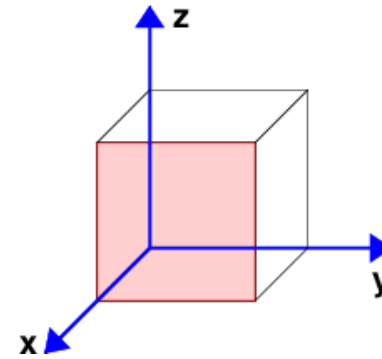
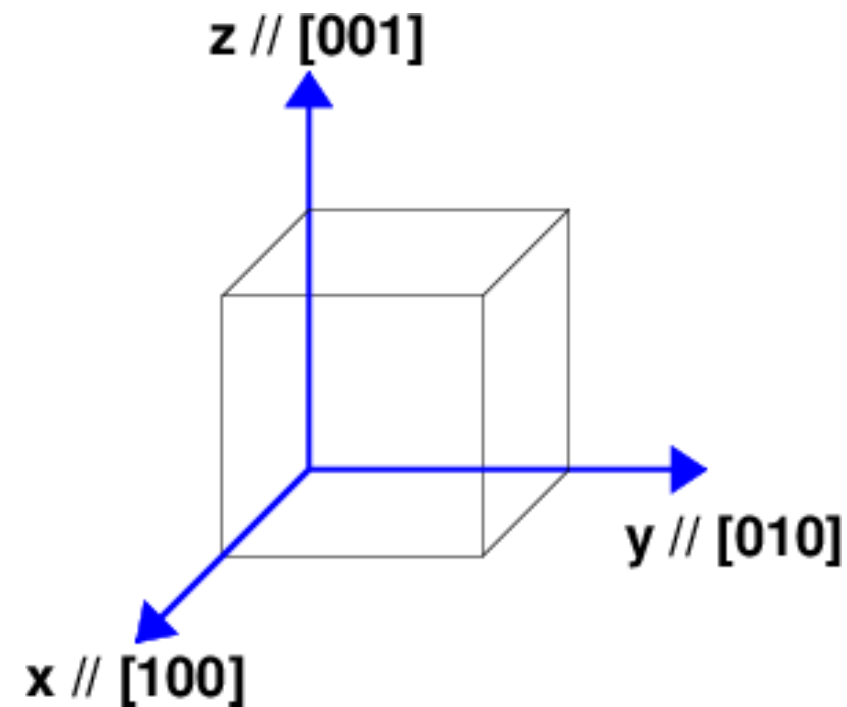
Représentation de l'orientation d'un grain :

- Opération de passage entre le système de l'échantillon et le système du grain.

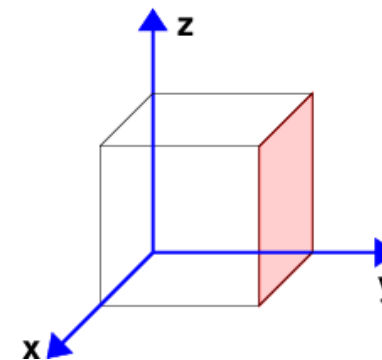
En analyse de textures, on se base sur des systèmes de coordonnées cartésiennes, les opérations de passage d'un système à l'autre peuvent se représenter comme :

- Des matrices de rotation (en 3D) ;
- 3 rotations successives, définissant des angles d'Euler.

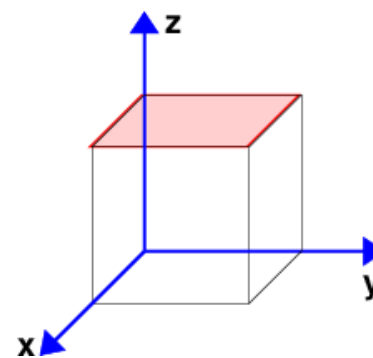
# Coordonnées associées à un cristal cubique



Plan :  $(100)$   
Normale :  $[1,0,0]$



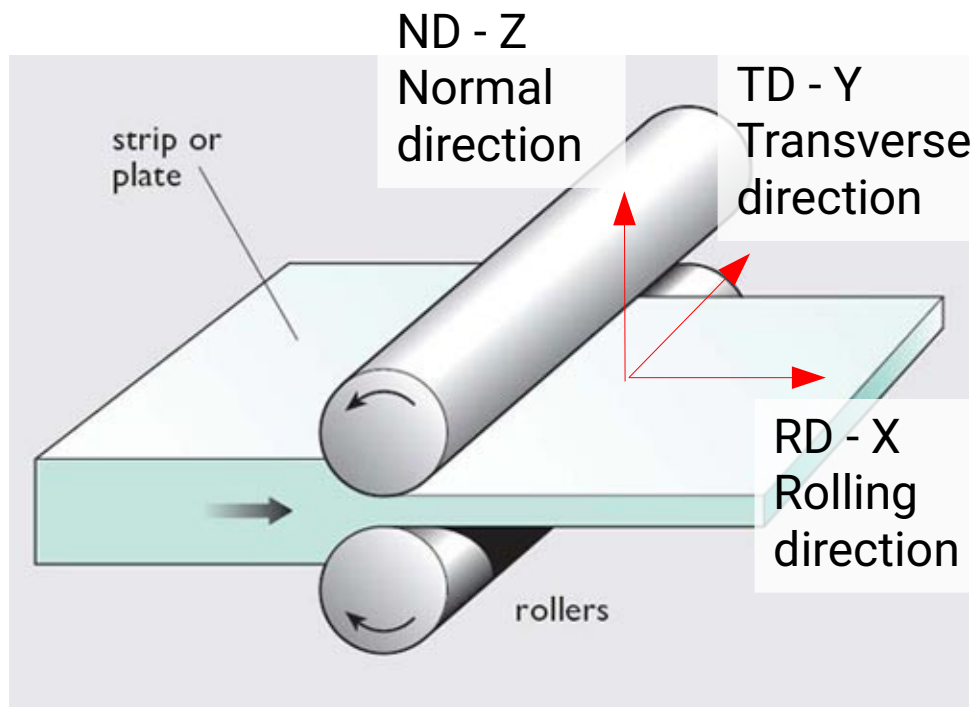
Plan :  $(010)$   
Normale :  $[0,1,0]$



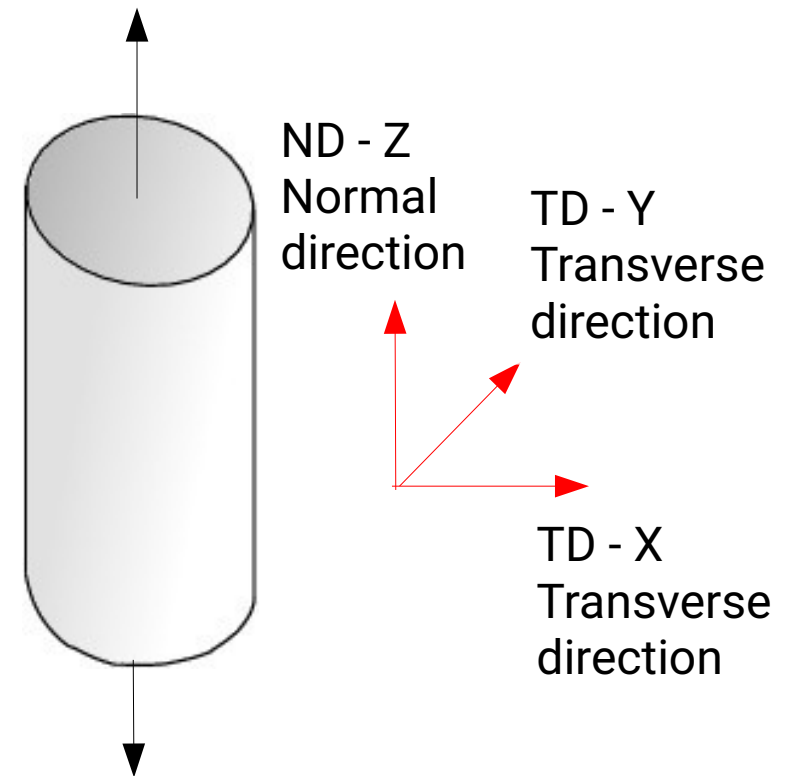
Plan :  $(001)$   
Normale :  $[0,0,1]$

# Coordonnées associées au polycristal

Dépend de l'environnement subi par le polycristal



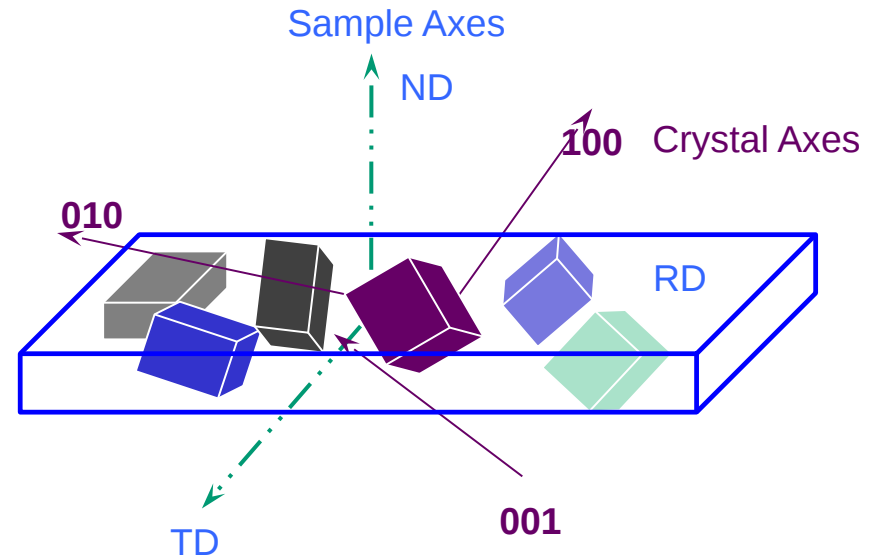
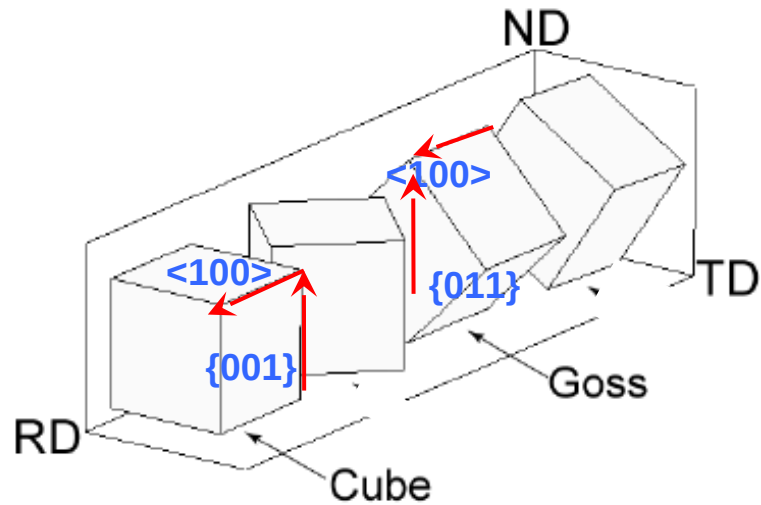
**Laminage  
(rolling)**



**Traction**

# Orientation cristallographique

On utilise des angles d'Euler pour représenter les orientations de grains/ échantillon



Composante	RD	ND
Cube	$\langle 100 \rangle$	$\{001\}$
Goss	$\langle 100 \rangle$	$\{011\}$
Brass (laiton)	$\langle 112 \rangle$	$\{110\}$
Copper (cuivre)	$\langle 111 \rangle$	$\{112\}$

Rotation 1 ( $\phi_1$ ): rotate sample axes about ND

Rotation 2 ( $\Phi$ ): rotate sample axes about rotated RD

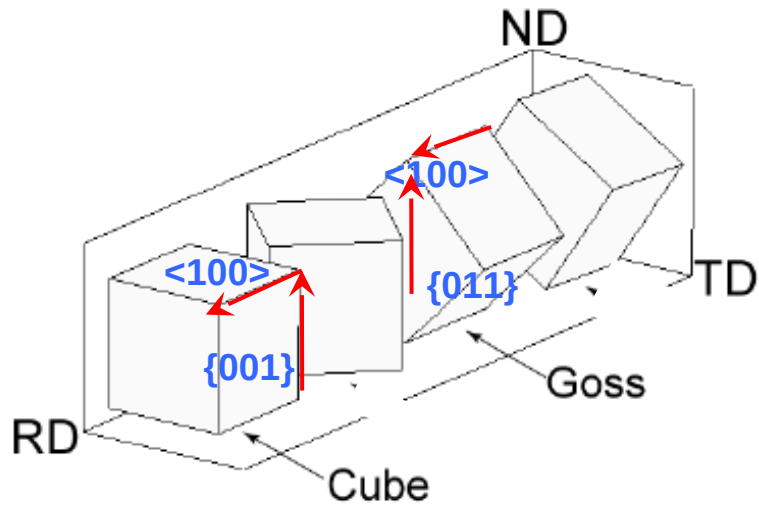
Rotation 3 ( $\phi_2$ ): rotate sample axes about rotated ND

C. N. Tomé and R. A. Lebensohn, Crystal Plasticity, presentation at Pohang University of Science and Technology, Korea, 2009

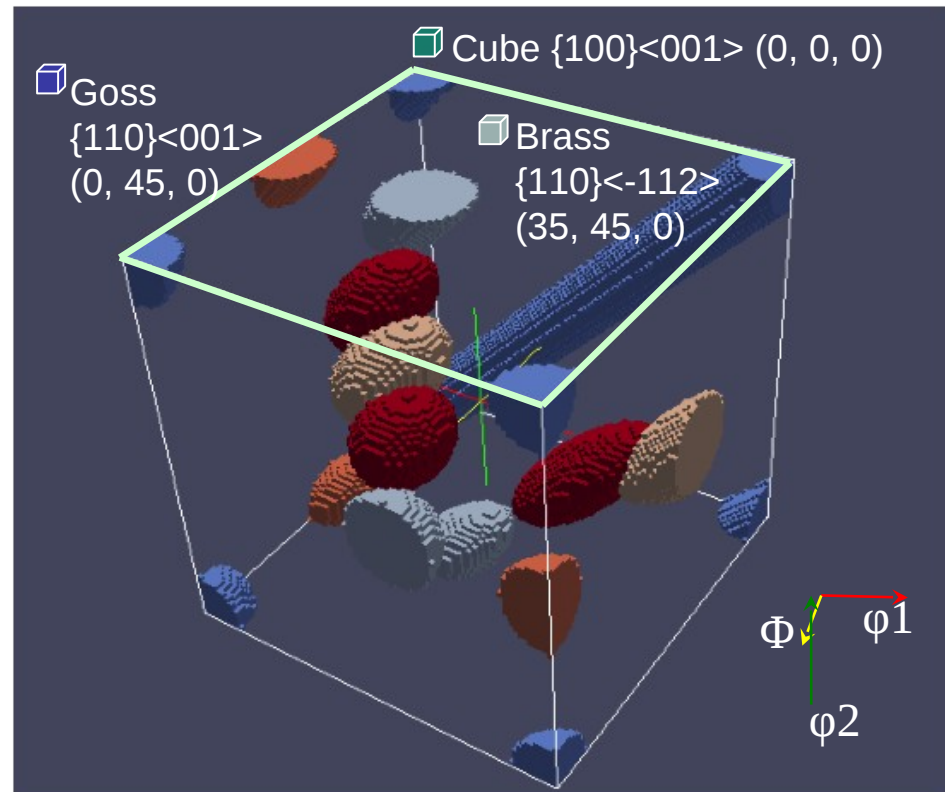


# Espace des orientations

On utilise des angles d'Euler pour représenter les orientations de grains/ échantillon

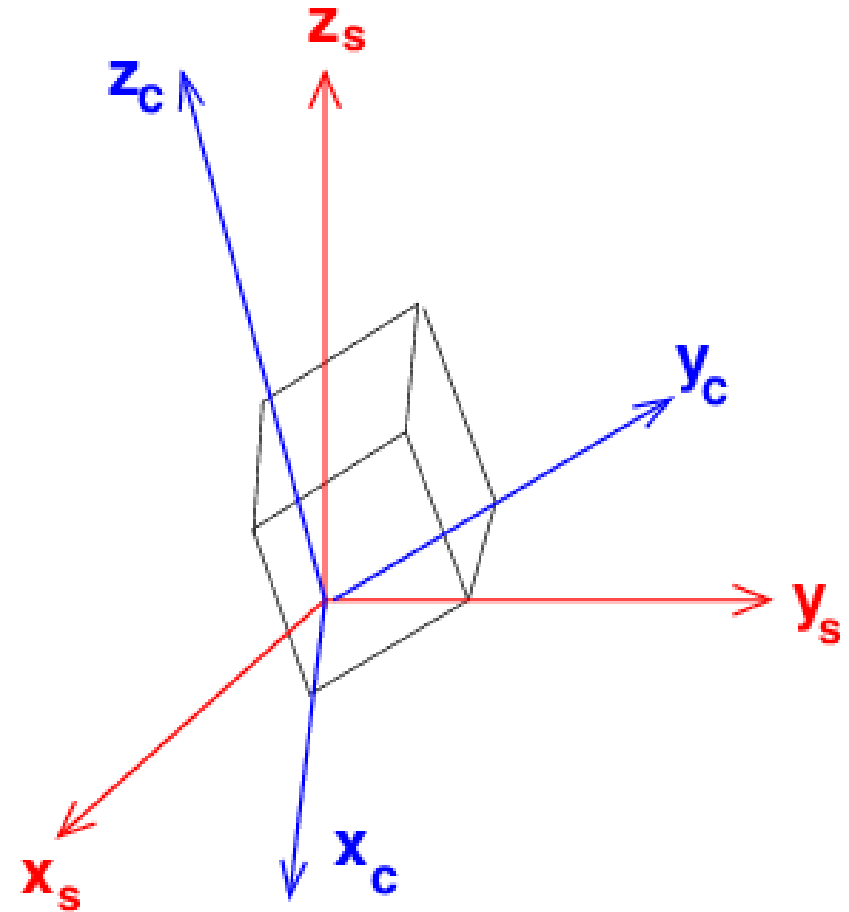


Composante	RD	ND
Cube	$\langle 100 \rangle$	$\{001\}$
Goss	$\langle 100 \rangle$	$\{011\}$
Brass (laiton)	$\langle 112 \rangle$	$\{110\}$
Copper (cuivre)	$\langle 111 \rangle$	$\{112\}$



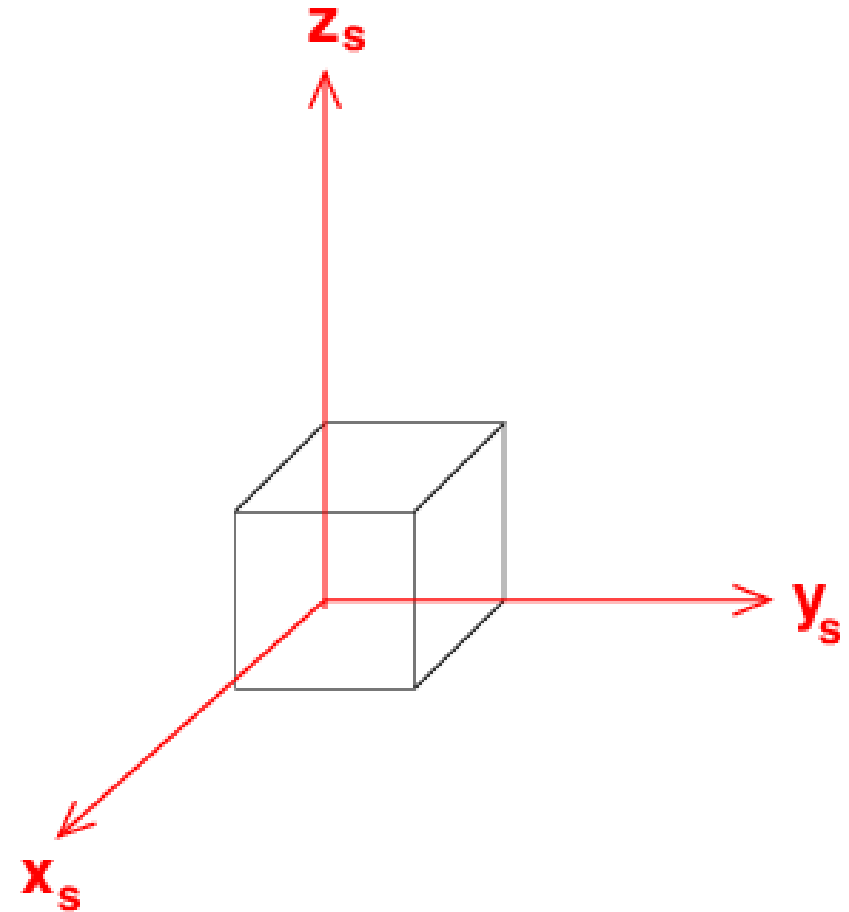
# Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal



# Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

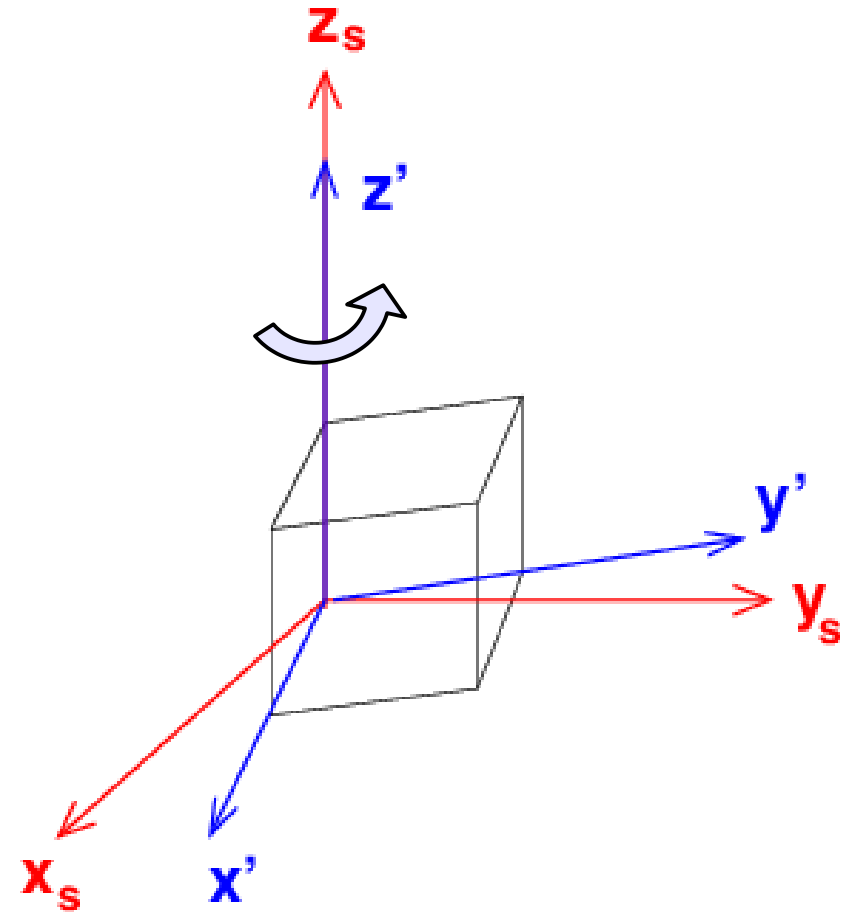
Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal



# Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

- première rotation

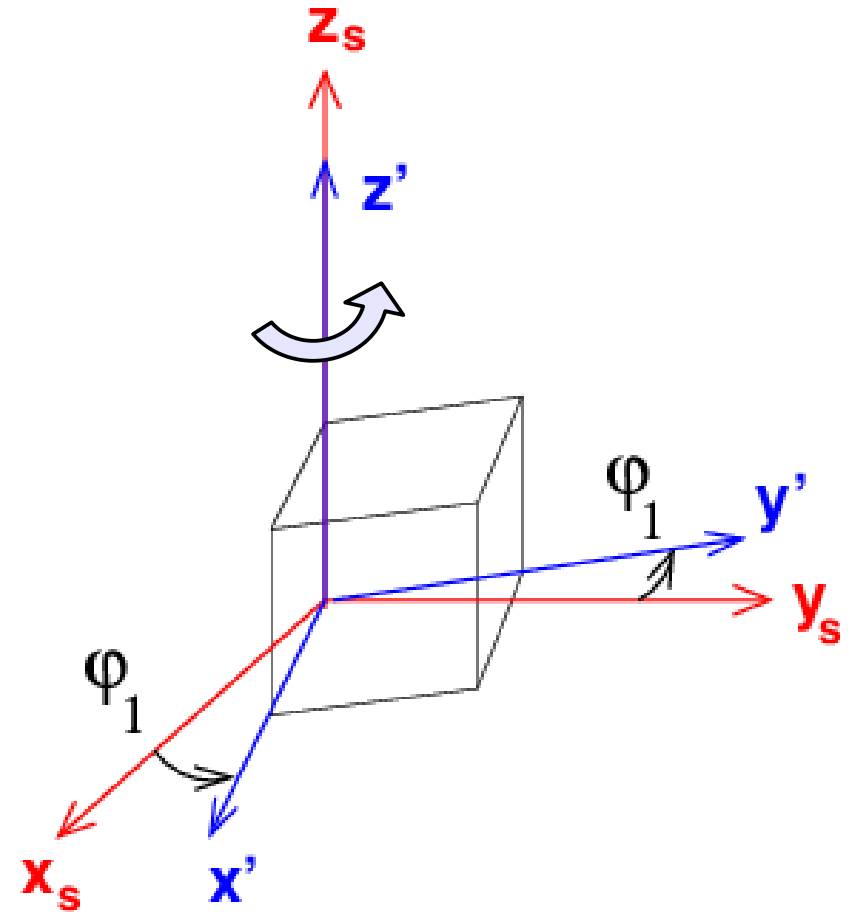


# Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

- première rotation

$\varphi_1$  -- rotation autour de  $z_s$  ;



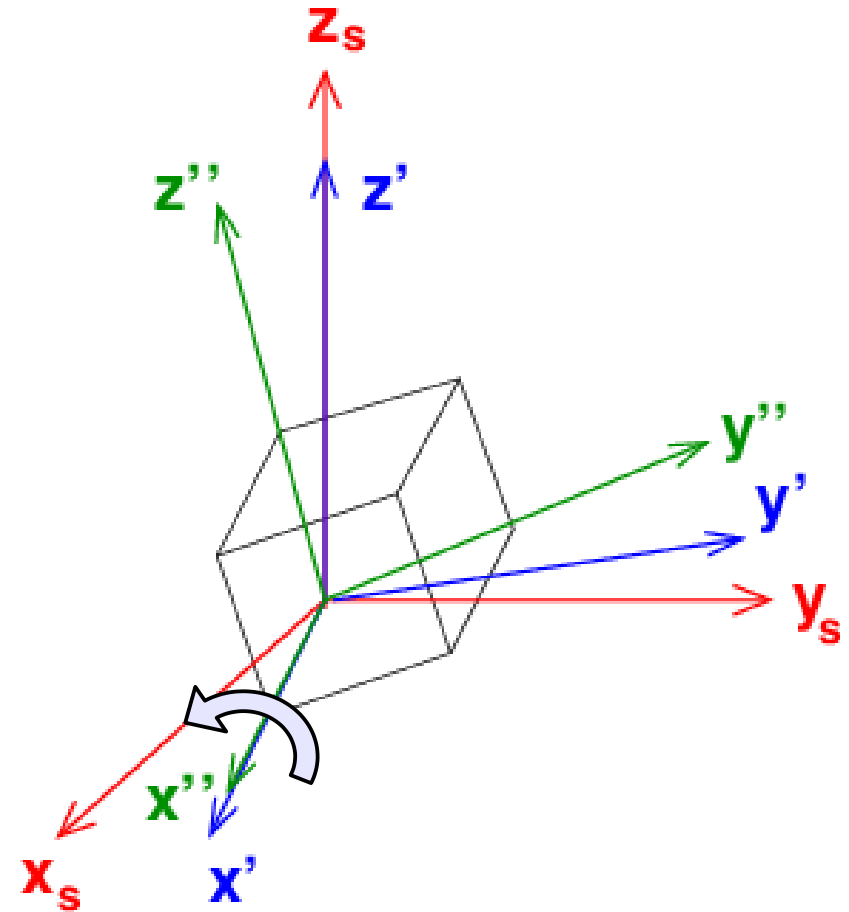
# Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

- première rotation

$\varphi_1$  -- rotation autour de  $z_s$  ;

- deuxième rotation





# Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

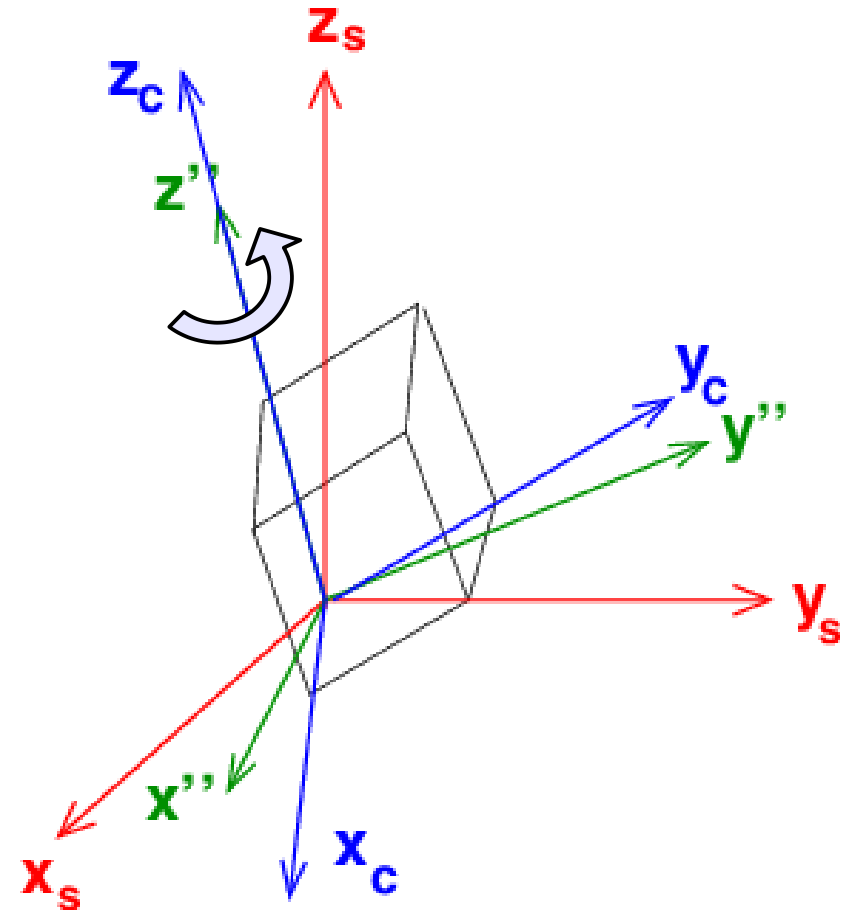
- première rotation

$\varphi_1$  -- rotation autour de  $z_s$  ;

- deuxième rotation

$\Phi$  -- rotation autour de  $x'$  ;

- troisième rotation





# Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

- première rotation

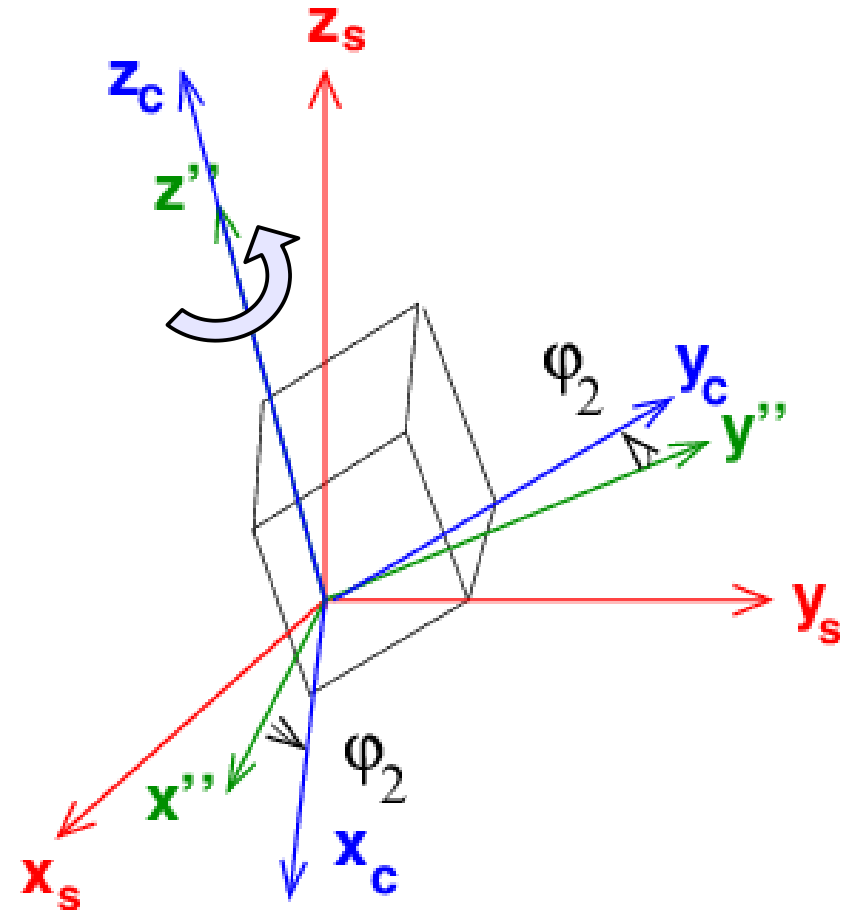
$\varphi_1$  -- rotation autour de  $z_s$  ;

- deuxième rotation

$\Phi$  -- rotation autour de  $x'$  ;

- troisième rotation

$\varphi_2$  -- rotation autour de  $z''$  ;



# Transformations de systèmes de coordonnées (Bunge)

Transformation du système de l'échantillon (sample), le polycristal, vers le système du cristal

- première rotation

$\varphi_1$  -- rotation autour de  $z_s$  ;

- deuxième rotation

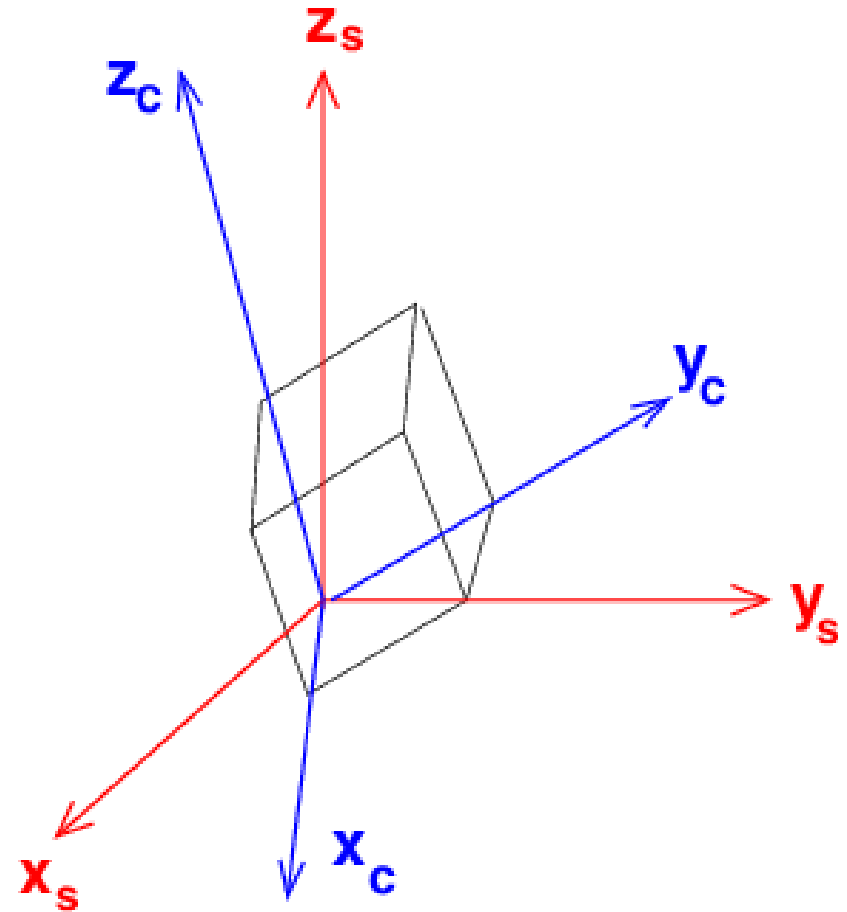
$\Phi$  -- rotation autour de  $x'$  ;

- troisième rotation

$\varphi_2$  -- rotation autour de  $z''$  ;

Orientation du cristal définie par les 3 angles d'Euler  $\varphi_1$ ,  $\Phi$ , et  $\varphi_2$ .

Convention de Bunge (il y en a d'autres)



# Pourquoi 3 angles ?

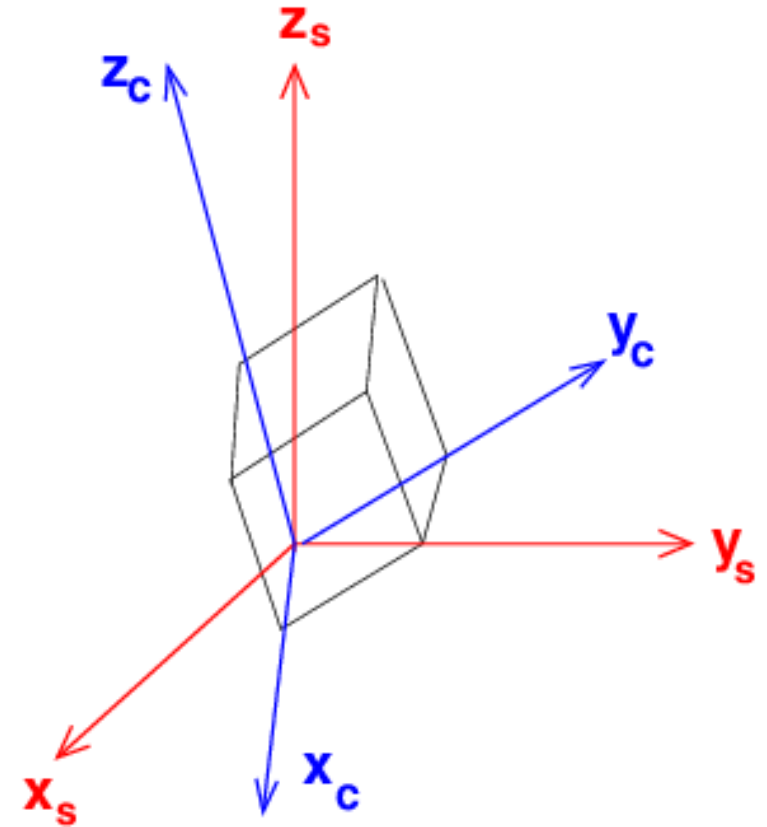
$\varphi_1$  -- rotation autour de  $z_s$  ;

$\Phi$  -- rotation autour de  $x'$  ;

$\varphi_2$  -- rotation autour de  $z''$  ;

Les angles  $\varphi_1$  et  $\Phi$  permettent de localiser la direction  $[001]$  ( $z_c$ ) par rapport aux axes de l'échantillon.

L'angle  $\varphi_2$  donne la rotation supplémentaire à appliquer pour placer les axes  $x_c$  et  $y_c$



## 2- Orientation d'un grain

### *b*- Représentation matricielle

# Représentation matricielle

En mathématiques, on peut représenter les rotations sous forme matricielle :

$$R_{\mathbf{x}}(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad R_{\mathbf{y}}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad R_{\mathbf{z}}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Rotation directe de  $\theta$   
autour de X

Rotation directe de  $\theta$   
autour de Y

Rotation directe de  $\theta$   
autour de Z

Pour combiner plusieurs rotations, on multiplie les matrices correspondantes. Par exemple, la matrice correspondant à une rotation de  $\alpha$  autour de  $\mathbf{z}$ , suivie par une rotation  $\beta$  autour de  $\mathbf{x}$ , puis par une rotation  $\gamma$  autour de  $\mathbf{z}$  sera :

$$g(\alpha, \beta, \gamma) = g_{\mathbf{z}}(\gamma) * g_{\mathbf{x}}(\beta) * g_{\mathbf{z}}(\alpha)$$

Attention à l'ordre ! La première rotation est à droite !

# Propriétés des matrices de rotations

L'inverse d'une matrice de rotation est sa transposée

$$g^{-1} = {}^t g$$

Le produit de deux rotations est une rotation

$$g_3 = g_2^* g_1$$

En dimension  $>2$ , la multiplication de matrices de rotation n'est pas commutative

$$g_1^* g_2 \neq g_2^* g_1$$

Ce sont des matrices orthogonales (ne changent pas la longueur des vecteurs)

$$\det(g) = 1$$

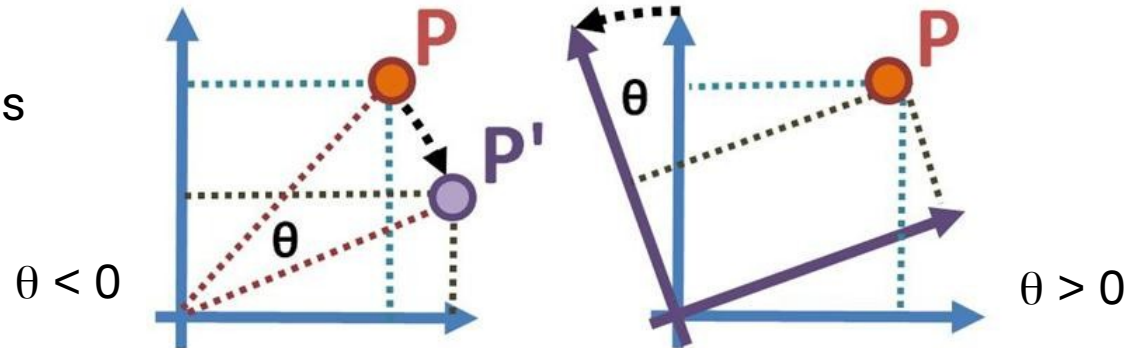
$$\sqrt{(g_{11})^2 + (g_{12})^2 + (g_{13})^2} = 1$$

$$\sqrt{(g_{i1})^2 + (g_{i2})^2 + (g_{i3})^2} = 1$$

$$\sqrt{(g_{1i})^2 + (g_{2i})^2 + (g_{3i})^2} = 1$$

# Rotations passive -- rotations actives

Rotation active :  
Le point tourne dans  
un référentiel fixe



Rotation passive :  
Le point est fixe, le  
référentiel tourne...

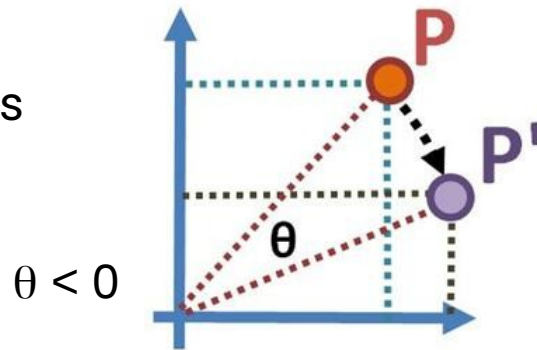
En sciences de matériaux, on cherche à exprimer les propriétés dans différents systèmes de coordonnées (constantes élastiques dans le système du grain, contraintes dans le système de l'échantillon...), par contre, le matériau ne bouge pas.

En mécanique du solide, on étudie des mouvements : on utilise des rotations actives.

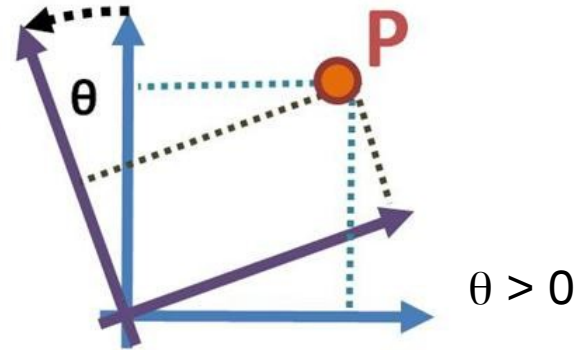
**En analyse de texture**, on cherche donc toujours à transformer les axes : **on utilise toujours des rotations passives.**

# Rotations passive -- rotations actives

Rotation active :  
Le point tourne dans  
un référentiel fixe



Rotation passive :  
Le point est fixe, le  
référentiel tourne...



$$\begin{cases} x' = x \cos \theta - y \sin \theta \\ y' = x \sin \theta + y \cos \theta \end{cases}$$

$$g = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} x' = x \cos \theta + y \sin \theta \\ y' = -x \sin \theta + y \cos \theta \end{cases}$$

$$g = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$



# Angles de Bunge – Matrices de rotation

Rotation 1 ( $\varphi_1$ ) : tourne les axes autour de l'axe 3 (z) de l'échantillon (rotation directe, inverse des aiguilles d'une montre)

$$g_1 = \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 & 0 \\ -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Rotation 2 ( $\Phi$ ) : tourne les axes autour de l'axe 1 (x) du repère intermédiaire (rotation directe, inverse des aiguilles d'une montre)

$$g_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \Phi & \sin \Phi \\ 0 & -\sin \Phi & \cos \Phi \end{bmatrix}$$

Rotation 3 ( $\varphi_2$ ) : tourne les axes autour de l'axe 3 (z) du repère intermédiaire (rotation directe, inverse des aiguilles d'une montre)

$$g_3 = \begin{bmatrix} \cos \varphi_2 & \sin \varphi_2 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$g(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = g_3 \cdot g_2 \cdot g_1$$

$$= \begin{bmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & \sin \varphi_2 \sin \Phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & \cos \varphi_2 \sin \Phi \\ \sin \varphi_1 \sin \Phi & -\cos \varphi_1 \sin \Phi & \cos \Phi \end{bmatrix}$$

# Interprétation géométrique

Axe x du cristal, exprimé dans le système échantillon

$$g = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix}$$

Axe y du cristal, exprimé dans le système échantillon

Axe z du cristal, exprimé dans le système échantillon

Axe x échantillon, exprimé dans le système du cristal

$$g = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix}$$

Axe y échantillon, exprimé dans le système du cristal

Axe z échantillon, exprimé dans le système du cristal

# 2- Orientation d'un grain

## c- Représentation graphique – Figures de pôle

# Problèmes de représentation

---

Personne (ou presque) n'arrive à visualiser les angles d'Euler.

Comment représenter des rotations, dans un espace à 3 dimensions, en 2 dimensions ?

Un polycristal est constitué de milliers de grains : impossible (ou presque) de regarder les triplets d'angles d'Euler pour chacun des grains.

Solution : ***figures de pôle.***

# Qu'est qu'un pôle ?

## Définition importante en texture

- Pôle = normale à un plan cristallographique ;
- Orientation d'un plan repérée par son pôle.

## Dans un cristal cubique :

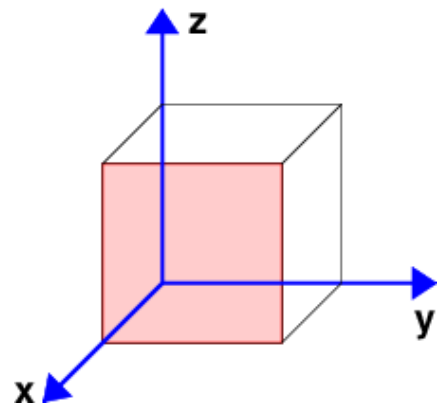
- plans sont orthogonaux aux directions de mêmes indices
- (001) orthogonal à [001]

## Attention !!!

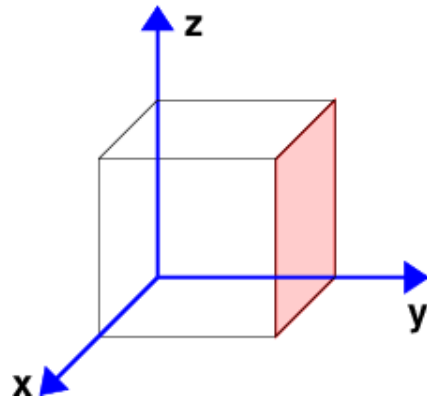
*Cette relation n'est pas vrai pour les cristaux autres que cubiques !*

*La direction [kkl] n'est pas nécessairement orthogonale au plan (hkl).*

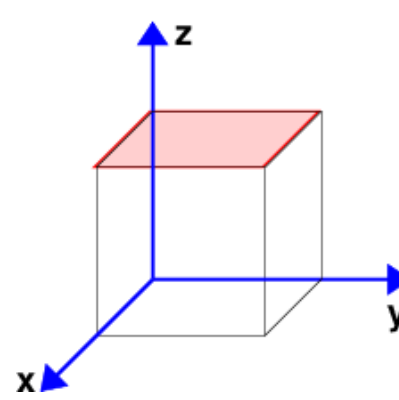
# Pôles dans la structure cubique



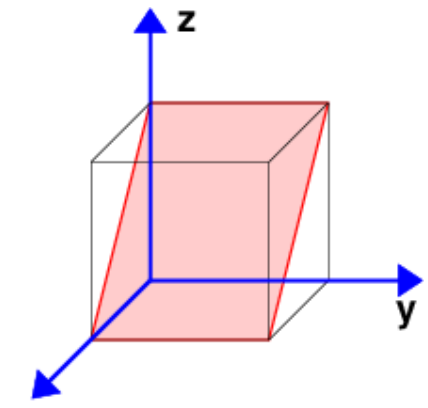
Plan : (100)  
Normale : [1,0,0]



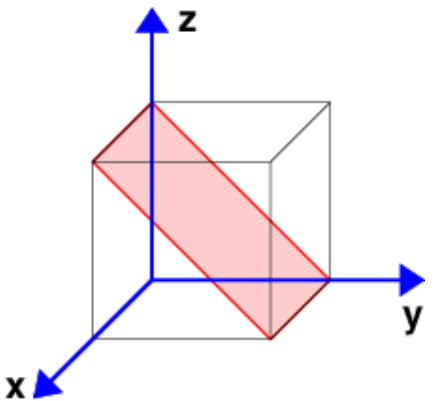
Plan : (010)  
Normale : [0,1,0]



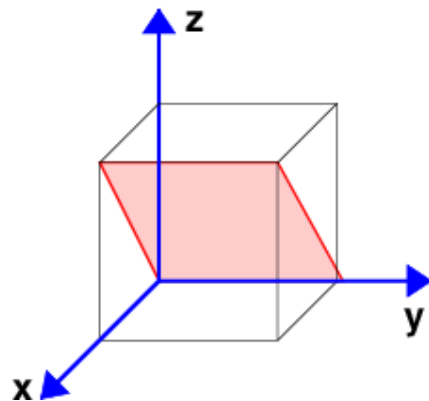
Plan : (001)  
Normale : [0,0,1]



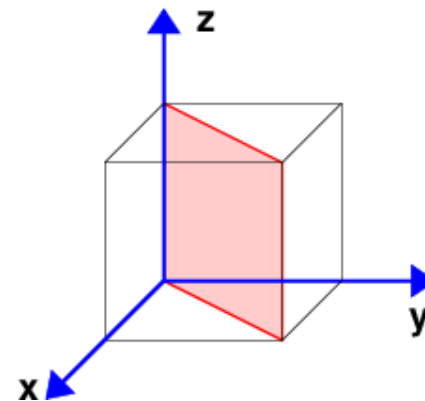
Plan : (101)  
Normale :  $[1,0,1]/\sqrt{2}$



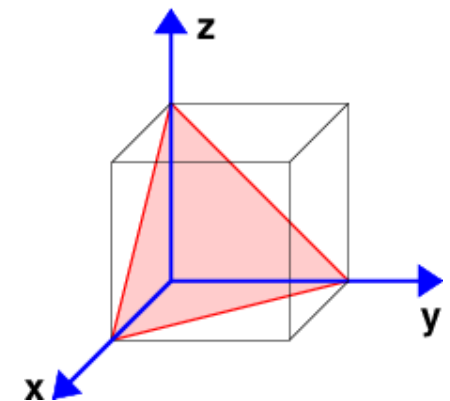
Plan : (011)  
Normale :  $[0,1,1]/\sqrt{2}$



Plan : (-101)  
Normale :  $[-1,0,1]/\sqrt{2}$

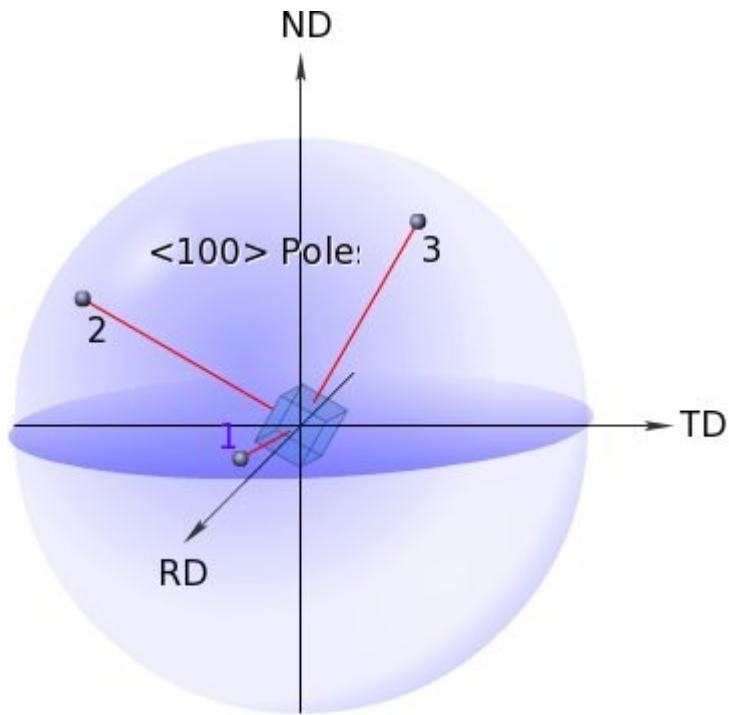


Plan : (-110)  
Normale :  $[-1,1,0]/\sqrt{2}$

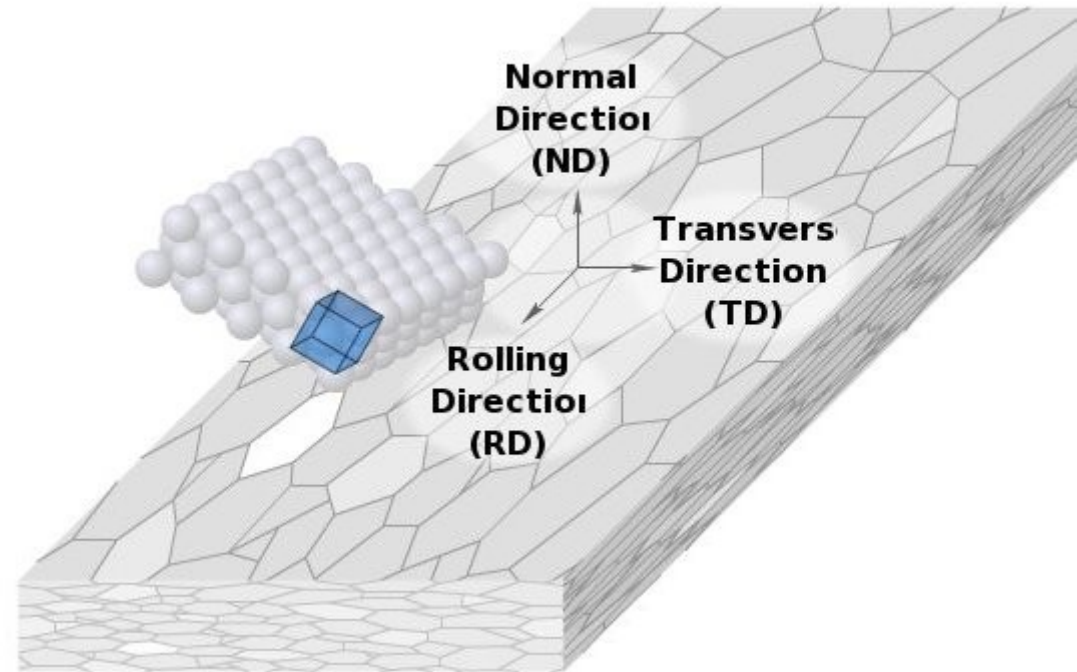


Plan : (111)  
Normale :  $[1,1,1]/\sqrt{3}$

# Figure de pôle



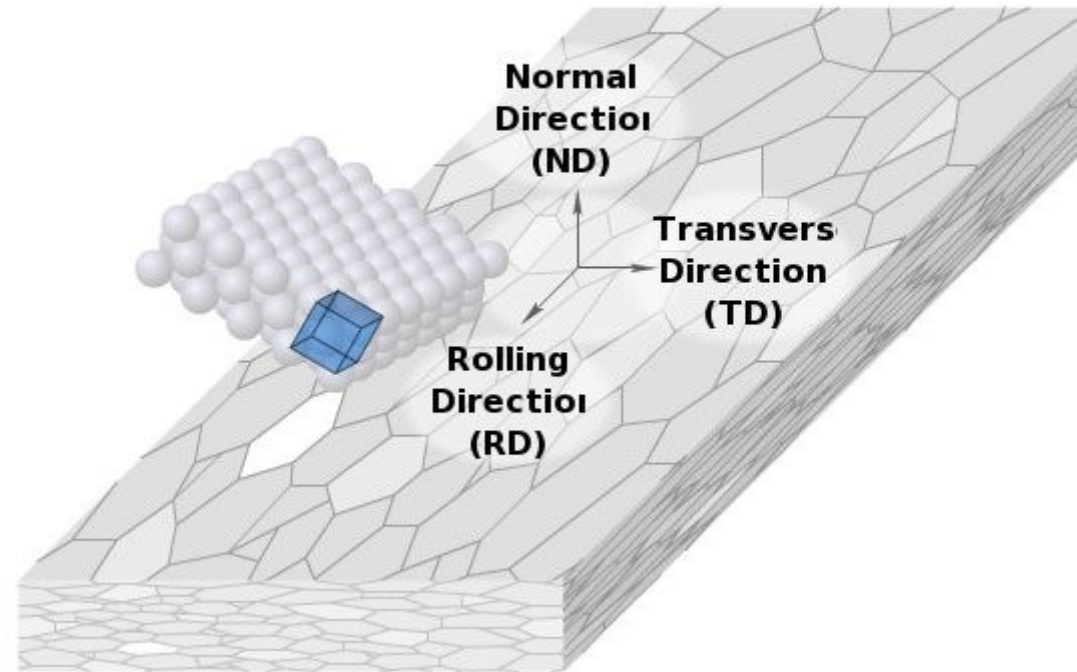
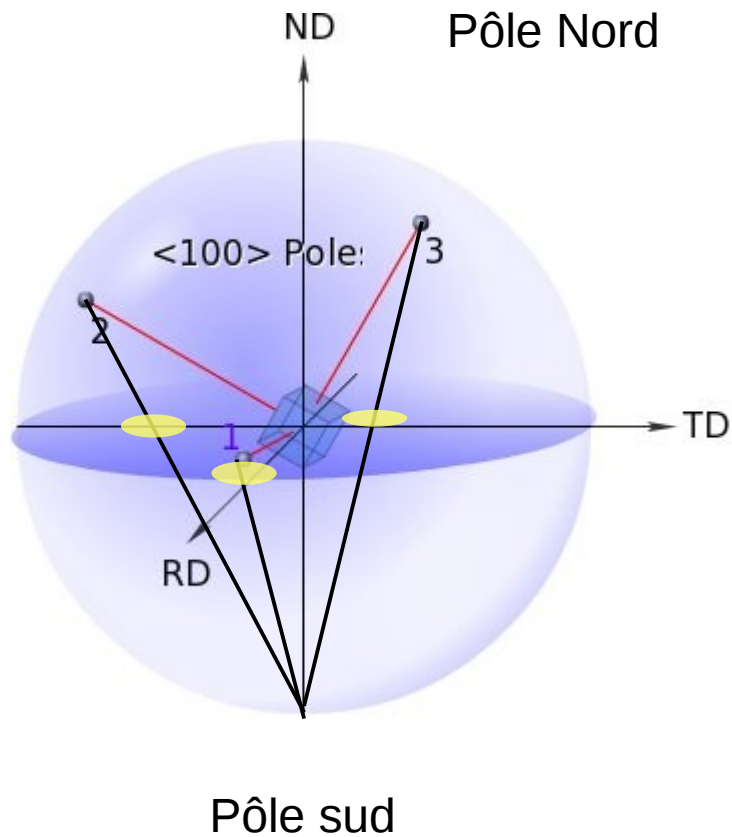
Orientation des pôles  $[100]$ ,  $[010]$ ,  $[001]$  : pôles  $\langle 100 \rangle$



Grain de structure cubique dans un échantillon déformé

Illustrations : aluMatter

# Figure de pôle



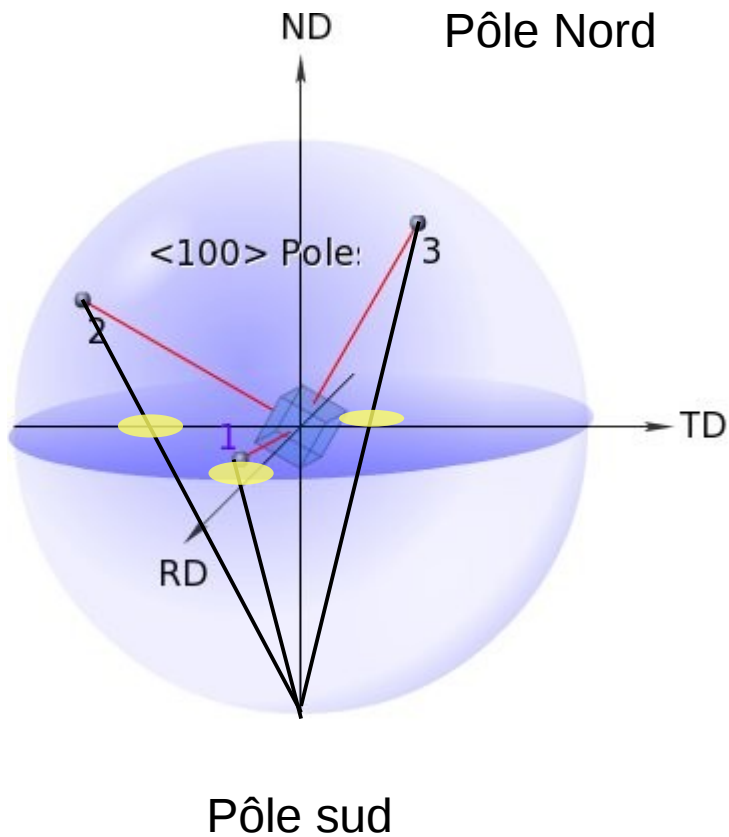
Droites entre pôles  $\langle 100 \rangle$  et le pôle sud  
Intersection avec le plan équatorial

Grain de structure cubique dans  
un échantillon déformé

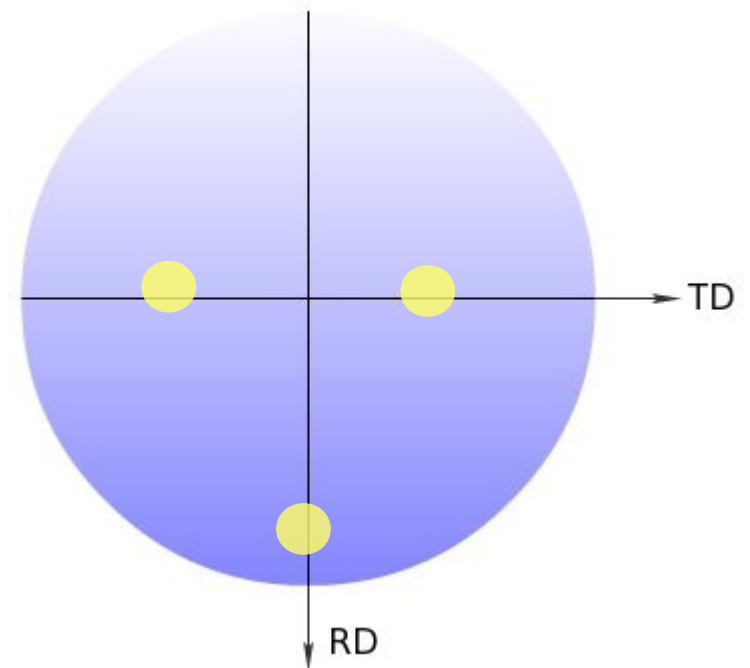
Illustrations : aluMatter



# Figure de pôle



*Figure de pôle <100>*



Droites entre pôles <100> et le pôle sud  
Intersection avec le plan équatorial

Vue depuis le pôle Nord

Illustrations : aluMatter

Prendre un cristal cubique, avec

- $[100]$  // RD
- $[010]$  // TD
- $[001]$  // ND

Tracer la figure de pôle  $\langle 100 \rangle$

Tracer la figure de pôle  $\langle 111 \rangle$

Illustrations : aluMatter

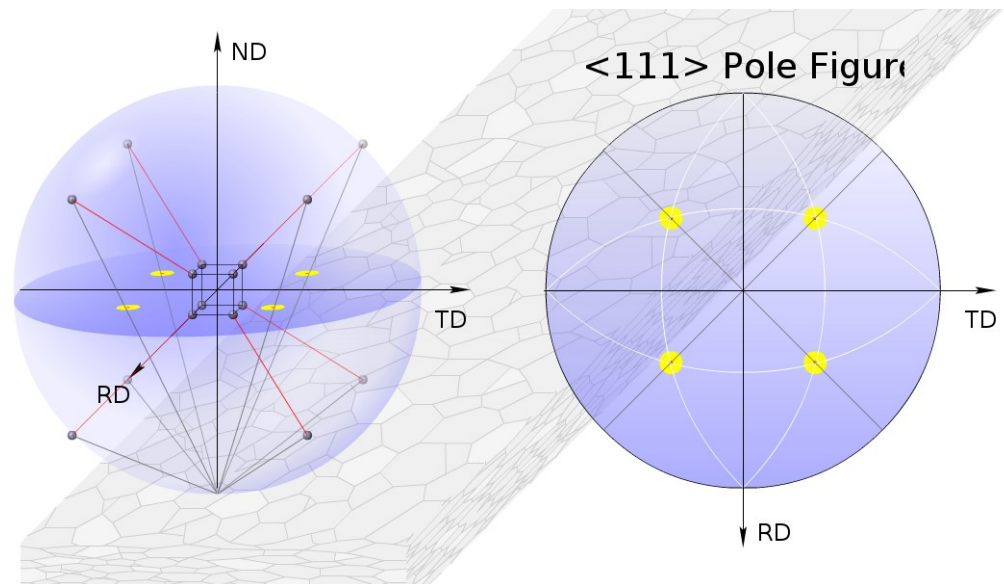
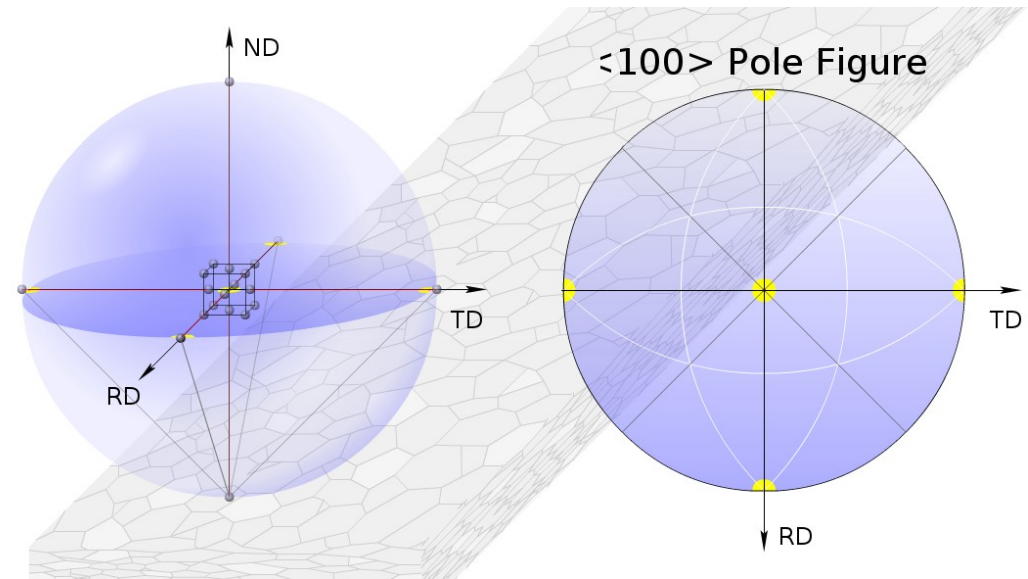
# Exercice

Prendre un cristal cubique, avec

- $[100] // \text{RD}$
- $[010] // \text{TD}$
- $[001] // \text{ND}$

Tracer la figure de pôle  $\langle 100 \rangle$

Tracer la figure de pôle  $\langle 111 \rangle$



Illustrations : aluMatter

Prendre un cristal cubique, avec

- $[100]$  // RD
- $[010]$  // TD
- $[001]$  // ND

Tournez le de  $45^\circ$  autour de ND

Tracer la figure de pôle  $\langle 100 \rangle$

Tracer la figure de pôle  $\langle 111 \rangle$

Illustrations : aluMatter

# Exercice

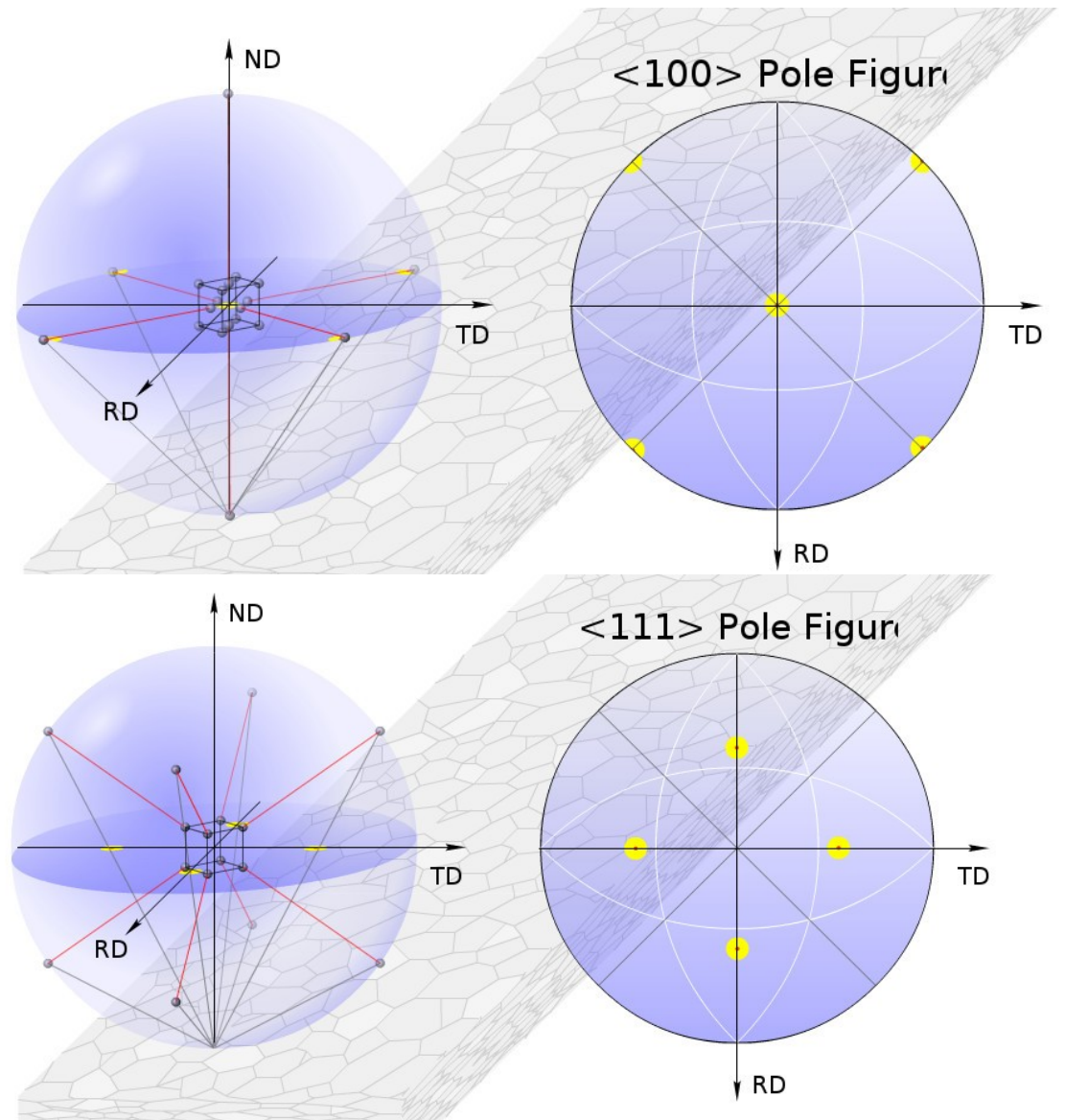
Prendre un cristal cubique, avec

- $[100]$  // RD
- $[010]$  // TD
- $[001]$  // ND

Tournez le de  $45^\circ$  autour de ND

Tracer la figure de pôle  $\langle 100 \rangle$

Tracer la figure de pôle  $\langle 111 \rangle$



Illustrations : aluMatter

Prendre un cristal cubique, avec

- $[100]$  // RD
- $[010]$  // TD
- $[001]$  // ND

Tournez le de  $45^\circ$  autour de TD

Tracer la figure de pôle  $\langle 100 \rangle$

Tracer la figure de pôle  $\langle 111 \rangle$

Illustrations : aluMatter

# Exercice

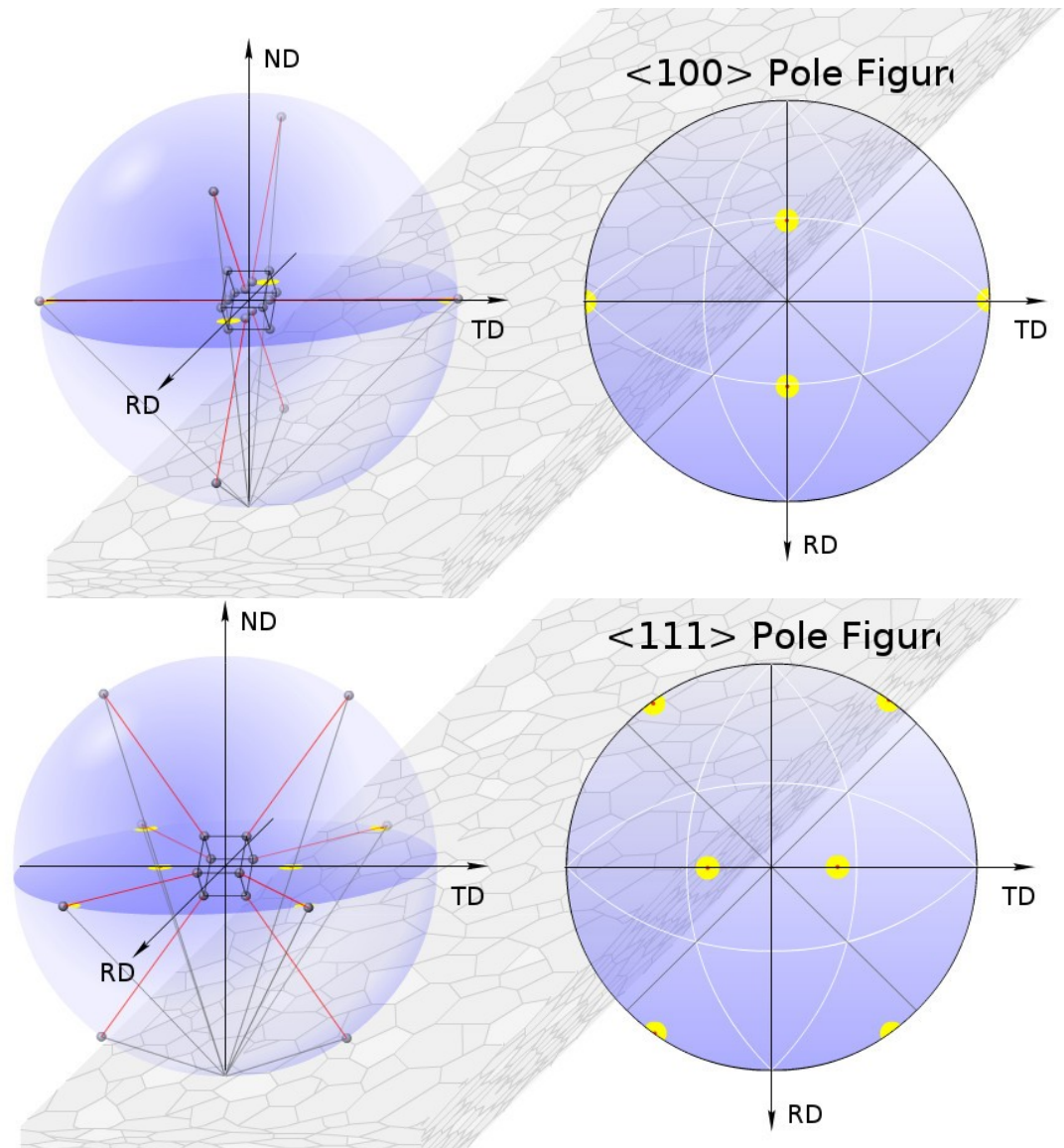
Prendre un cristal cubique, avec

- $[100] // RD$
- $[010] // TD$
- $[001] // ND$

Tournez le de  $45^\circ$  autour de TD

Tracer la figure de pôle  $\langle 100 \rangle$

Tracer la figure de pôle  $\langle 111 \rangle$



Illustrations : aluMatter